Acta Agrophysica, 1999, 22,31-38

BADANIA STRUKTURY GLEBY ZA POMOCĄ KOMPUTEROWEJ SYMULACJI UPAKOWANIA CZĄSTEK

H. Czachor

Instytut Agrofizyki im. B. Dobrzańskiego, Polska Akademia Nauk
ul. Doświadczalna 4, P.O. Box 201, 20-290 Lublin 27

S t r e s z c z e n i e. Struktura ośrodka granularnego na poziomie mikroskopowym określona jest przez jego skład granulometryczny i porowatość. Innymi słowy jest ona określona przez przestrzenny rozkład tworzących go cząstek. Rozkład ten można wyznaczyć przez komputerową symulację upakowania zbioru cząstek kulistych o składzie granulometrycznym badanej gleby, czyli stworzenie ośrodka wirtualnego. Przedstawiono opis takiego algorytmu oraz warunki jakie muszą być spełnione, aby ośrodek wirtualny odzwierciedlał najistotniejsze cechy gleby mineralnej. Wykonano symulacje upakowania dla 5 różnych składów granulometrycznych odpowiadających glebom piaszczystym i pylasto - piaszczystym. Określono porowatości otrzymanych ośrodków wirtualnych i porównano je z wartościami doświadczalnymi. Stwierdzono, że błąd względny porowatości w żadnym przypadku nie przekraczał 5%, co było potwierdzeniem możliwości wykorzystania tej metody do badań realnych układów granularnych w tym gleb mineralnych.

S ł o w a k l u c z o w e: granularny ośrodek wirtualny, symulacja , skład granulometryczny

WSTĘP

Procesy transportu masy i energii zachodzące w układzie: gleba - roślina - atmosfera opisywane są za pomocą układu równań różniczkowych typu dyfuzyjnego dotyczących: wody, soli mineralnych, ciepła, gazów (powietrza, dwutlenku węgla) itp. W równaniach tych właściwości gleby uwzględniane są za pomocą, odpowiednich dla danego strumienia, współczynników przenoszenia. Współczynniki te zależą m.in. od składu granulometrycznego oraz geometrii i rozkładu wielkości porów w glebie i dlatego można je traktować za pochodne struktury gleby, rozumianej jako przestrzenna konfiguracja cząstek fazy stałej gleby [3,6]. Poznanie tak rozumianej struktury jest więc potrzebne, lecz praktycznie niemożliwe lub bardzo trudne do określenia.

Rozwój techniki komputerowej umożliwia obecnie komputerową symulację i trójwymiarową rekonstrukcję geometrii cząstek granularnego układu porowatego o żądanej porowatości i składzie granulometrycznym badanej gleby. Celem opracowania jest przedstawienie opracowanego algorytmu tworzenia wirtualnej struktury granularnej, jego możliwości i ograniczeń w zastosowaniu do badań struktury gleby.

WIRTUALNY OŚRODEK GRANULARNY

W prezentowanym opracowaniu ośrodek glebowy modelowany jest zbiorem cząstek kulistych, których rozkład średnic określony jest przez skład granulometryczny gleby. Drugim czynnikiem branym pod uwagę przy rekonstrukcji jest porowatość gleby.

Problem polega więc na znalezieniu algorytmu umożliwiającego upakowanie polidyspersyjnego zbioru cząstek kulistych w taki sposób, aby powstały układ przestrzenny miał porowatość identyczną / zbliżoną do porowatości badanej gleby. Termin upakowanie oznacza ułożenie zbioru cząstek zgodnie z podstawowymi zasadami równowagi mechanicznej i geometrii.

W przyjętym modelu tworzenie struktury wirtualnych cząstek odbywa się stopniowo, tzn. cząstka po cząstce. Zasady upakowania dla każdej z nich sprowadzają się do znalezienia położenia, w którym:

jest ona styczna do trzech cząstek wcześniej przyłączonych do tworzonego agregatu,

jej powierzchnia nie przecina (ang. non overlaping) żadnej z pozostałych, wcześniej przyłączonych cząstek.

Dla cząstki o numerze *i*-tym mającym promień *R(i)* określenie współrzędnych środka *X(i), Y(i), Z(i)* sprowadza się do rozwiązania układu równań

$$\begin{aligned}
&\big(X(i)-X(k)\big)^2+\big(Y(i)-Y(k)\big)^2+\big(Z(i)-Z(k)\big)^2=\big(R(i)-R(k)\big)^2\\
&\big(X(i)-X(l)\big)^2+\big(Y(i)-Y(l)\big)^2+\big(Z(i)-Z(l)\big)^2=\big(R(i)-R(l)\big)^2\\
&\big(X(i)-X(m)\big)^2+\big(Y(i)-Y(m)\big)^2+\big(Z(i)-Z(m)\big)^2=\big(R(i)-R(m)\big)^2
\end{aligned} \tag{1}$$

gdzie: indeksy *k, l, m* określają numery cząstek, do których styczna jest cząstka *i*-ta.

Algorytm tworzenie wirtualnej struktury trójwymiarowej składa się z kilku bloków, których celem kolejno jest:

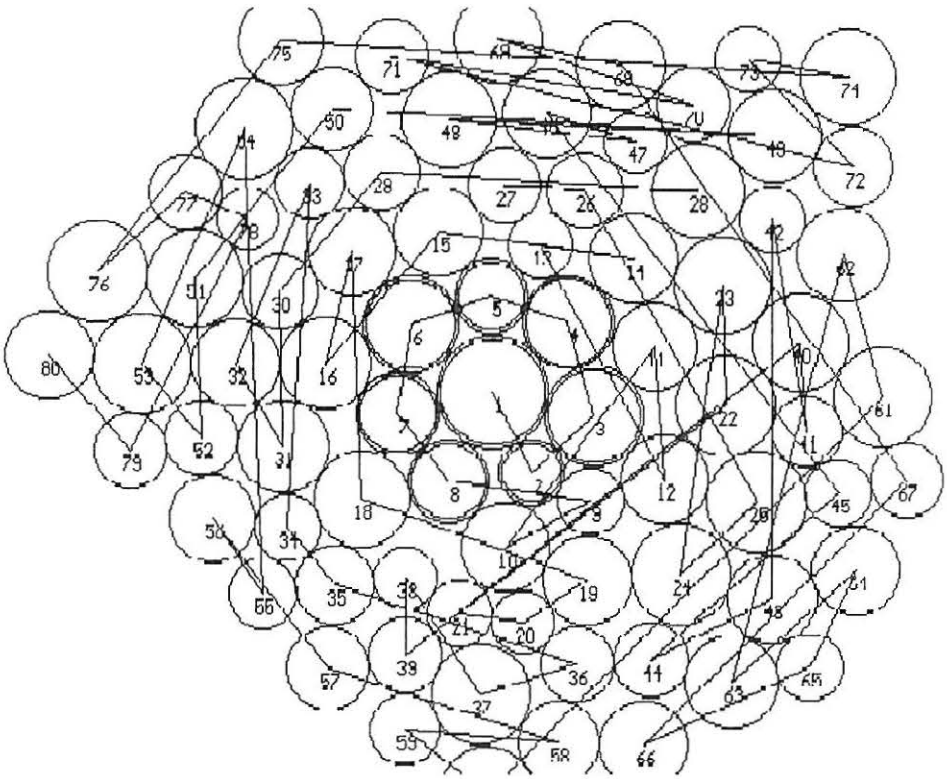
1. zamiana udziałów masowych składu granulometrycznego na udziały określające ilość cząstek w poszczególnych klasach granulometrycznych,
2. utworzenie "zarodka" składającego się z 3-ch wzajemnie stycznych cząstek należących do najdrobniejszej frakcji,
3. przyłączenie kolejnej cząstki, które realizowane za pomocą iteracyjnej procedury, wewnątrz której można wyróżnić:
   - określenie promienia cząstki,
   - określanie współrzędnych położenia *X,Y,Z* w którym jest ona styczna do trzech cząstek o numerach *k, l, m*,
   - sprawdzenie warunku "overlaping" i ewentualne powtórzenie procedury z poprzedniego punktu w odniesieniu do innej trójki cząstek,
   - przypisanie nowej cząstce kolejnego numeru (przyłączenie cząstki do struktury).

Celem ostatecznym programu jest stworzenie wirtualnej struktury, która miałaby taki sam skład garnulometryczny i porowatość jak badana gleba. W badaniach przyjęto założenie, że dwa układy, spełniające powyższe warunki: rzeczywisty i wirtualny, są podobne, co oznacza możliwość wnioskowania o właściwościach gleby na podstawie wyników uzyskanych z analizy układu wirtualnego.

Z powyższego założenia wynikają istotne warunki dotyczące cech, jakie musi mieć tworzona struktura wirtualna. Cząstki wewnątrz tworzonego układu muszą być ciasno upakowane, co wynika z wpływu pola grawitacyjnego na geometrię upakowania cząstek w warunkach rzeczywistych. Oznacza to, że wybór cząstek, do których może być przyłączana nowa cząstka nie jest dowolny.

W celu przedstawienia ogólnej idei algorytmu przedstawiono na Rys. 1 dwuwymiarowy (2*D*) analog tworzenia trójwymiarowej struktury witrualnej (3*D*).

Rysunek przedstawia zbiór cząstek (okręgów) o różnych średnicach. Każda cząstka ma numer określający kolejność jej przyłączenia do układu. Analiza rysunku pozwala zauważyć prawidłowość rządzącą tworzeniem struktury: cząstki przyłączane do układu otaczają możliwie "szczelnie" cząstki już w nim istniejące. Otaczanie następuje w



Rys. 1. Dwuwymiarowy analog upakowania cząstek trójwymiarowych.
Fig. 1. 2*D* analog of 3*D* particle packing.

kolejności liczb naturalnych, tzn. najpierw otaczana jest cząstka 1-a (numery cząstek otaczających 2,3,4,5,6,7,8), następna, tzn. 2-a, jest styczna do cząstek o numerach 1 i 3, a przyłączone zostały do niej cząstki 9,10. Dla 3-ej cząstki odpowiednio numery 1,2,4,9 określają cząstki styczne do niej przed rozpoczęciem obliczeń, w wyniku których przyłączone zostały numery 11, 12 itd. Taki sposób upakowywania w znacznym stopniu zapobiega powstawaniu wewnątrz struktury pustych obszarów o wymiarach większych od średnicy przyłączanych cząstek lub struktur nie mających cech badanego ośrodka.

Tworzenie wirtualnej struktury $3D$ odbywa się analogicznie jak dla przypadku $2D$, z tą różnicą, że obliczenia są bardziej złożone. Liczba kombinacji trójcząstkowych, jakie należy zbadać, aby określić położenie przyłączanej cząstki, rośnie bardzo szybko ze wzrostem ich liczby w układzie. Ograniczenie tej liczby było warunkiem realności planowanych badań. Dlatego ograniczono zbiór cząstek mogących tworzyć poszukiwaną konfigurację do tych, które znajdowały się w sąsiedztwie cząstki otaczanej.

CECHY STRUKTURY WIRTUALNEGO OŚRODKA GRANULARNEGO

Aby ośrodek wirtualny, tworzony według opisanej powyżej procedury, mógł służyć badaniu realnego układu glebowego, musi być do niego podobny tzn. charakteryzować się pewnymi jego cechami. Uznano że, najistotniejsze z nich z nich to:

1. nieuporządkowany charakter struktury,
2. porowatość układu wirtualnego musi być taka sama, jak porowatość układu będącego przedmiotem symulacji,
3. wielkość układu musi być na tyle duża, aby mógł on symulować ośrodek nieskończenie duży (w stosunku do rozmiarów tworzących go cząstek).

Brak którejkolwiek z tych cech w uzyskiwanych wirtualnych układach granularnych dyskwalifikowałby przedstawioną metodę.

WERYFIKACJA MODELU

Odpowiedź na pytanie, czy układy wirtualne generowane za pomocą opracowanych programów mają wymienione w poprzednim rozdziale cechy, jest możliwa na podstawie analizy ich porowatości.

Wykonując przekrój struktury $3D$ otrzymuje się obraz składający się ze zbioru okręgów o znanych promieniach i współrzędnych środków. W stereologii układ uważa się za nieuporządkowany, jeśli porowatość objętościowa Pv równa się porowatości powierzchniowej określonej na przekroju Ps [1,5]. Ponadto wartości porowatości powierzchniowej Ps określone dla dowolnych przekrojów płaskich winny być również sobie równe. Porowatości Pv i Ps określono analitycznie na podstawie zależności geometrycznych i znajomości geometrii struktury $2D$ i $3D$ [2].

Przedmiotem badań były modelowe struktury: frakcje piasku i piasek pylasty o składzie granulometrycznym przedstawionym w Tabeli 1. W tabeli tej znajdują się

również porowatości: ośrodków rzeczywistych P_{pom}, które zostały określone doświadczalnie i układów wirtualnych, które wyliczono.

Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że w odniesieniu do wszystkich badanych ośrodków warunek nieuporządkowania był spełniony, tzn. $Pv = Ps$, co stanowiło potwierdzenie założonego nieuprządkowanego charakteru struktury układu wirtualnego.

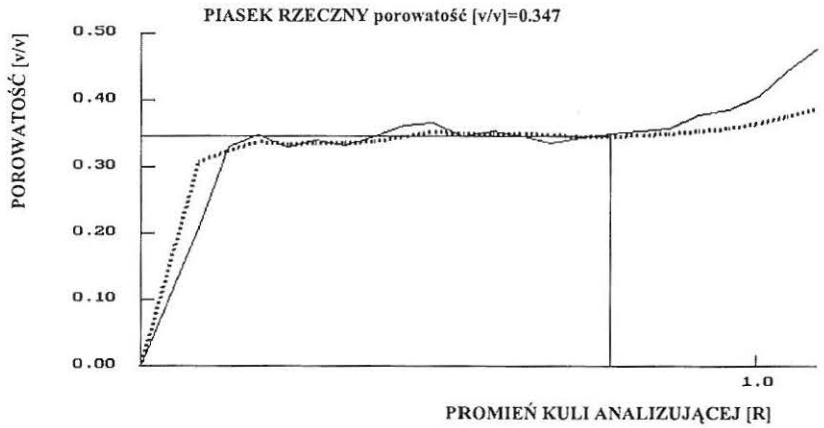
Z Tabeli 1 wynika ponadto, że porowatość układów wirtualnych jest bliska (błąd względny <=5%) porowatości ośrodków rzeczywistych, co oznacza spełnienie drugiego warunku ich podobieństwa.

Określenie minimalnej ilości cząstek (objętości), przy której układ mógłby być uznany za reprezentatywny dla danego składu granulometrycznego, wymaga stworzenia prostego kryterium weryfikującego. Kryterium to może być określone na podstawie sekwencji wyliczonych wartości porowatości objętościowych, odpowiadającej rosnącemu ciągowi objętości ośrodka. Minimalną objętość ośrodka, powyżej której porowatość jest stała, tzn. nie zależy od objętości analizowanego obszaru, przyjęto uważać za **objętość reprezentatywną**. Rysunek 2 przedstawia zmiany porowatości struktury wirtualnej piasku rzecznego (patrz Tabela 1) w zależności od promienia tzw. kuli analizującej. Kula ta umożliwia obliczenie porowatości tej części ośrodka jaka znajduje w jej wnętrzu. W miarę wzrostu promienia rośnie objętość analizowanej części ośrodka. Dla małych wartości promienia zmiany porowatości są stunkowo duże, a począwszy od pewnej wartości prawie nie zmieniają się, co świadczy tym, że objętość wewnątrz kuli analizującej jest wystarczająco duża i może być uznana za objętość reprezentatywną.

T a b e l a 1. Skład granulometryczny i porowatość badanych ośrodków piaszczysto - pylastych

T a b l e 1. Grain size distributions and the porosity values of investigated sandy and sandy loam media (measured and simulated)

Opis ośrodka (promień geometryczny frakcji granulometrycznej w mikrometrach)	Porowatość objętościowa (%)	
	z symulacji P_{sym}	Zmierzona P_{pom}
Kulki szklane:(10-31)-1,3%, (31-50)-16,0%, (50-62,5)-66,4%, (62,5-80,0)-14,1%	36,1	34,9
Frakcja piasku 1, (125-250)-100%	37,1	37.0
Frakcja piasku 2, (88,5-105,0) -100%	36,6	36,5
Frakcja piasku 3; (52,0-62,5)- 100%	40,1	39,0
Piasek rzeczny: (<25)-4,0%, (25-40)-1,0%, (40-50) -1,5%, (50-70)-3,0%, (75-100) -4.0%, (100-150) -15.5%, (150-250)- 25,0%, (250-350) -16,5%, (350-500) -14,3%, (500 -600)-5,2%, (600-750)-5,5%, (750-1000)-4,2%	34,7	34,2



Rys. 2. Zależność porowatości struktury wirtualnej od jej objętości.
Fig. 2. Porosity *vs* volume of virtual structure.

Tworzone układy granularne składały się z 20 000 - 30 000 cząstek kulistych. Kryterium powyższe zastosowane do zbadanych ośrodków pozwoliło na sformułowanie jakościowego wniosku ogólnego dotyczącego objętości reprezentatywnej: im większy jest stosunek średnic klas granulometrycznych największej do najmniejszej, tym większa liczebność cząstek jest wymagana, aby powstała objętość reprezentatywna. O ile dla układu monodyspersyjnego liczba ta wynosi ca 8000, o tyle dla piasku pylastego z Tabeli 1 - ca 30 000, co stanowiło górną granicę możliwości dla PC Pentium i Borland Pascala.

OGRANICZENIA METODY

Konieczność przedstawienie składu granulometrycznego badanej gleby w postaci udziałów liczby cząstek w klasach powoduje pewne ograniczenie możliwości badań układów granularnych za pomocą opisanej metody. Wynika to z faktu, że liczba cząstek związana z daną frakcją jest odwrotnie proporcjonalna do trzeciej potęgi średnicy (promienia) geometrycznej. Jeśli np. w glebie pyłowej udziały odpowiadające piaskowi grubemu i pyłowi drobnemu są jednakowe, to stosunek liczby cząstek związanych z tymi frakcjami wynosi około 10 000. W konsekwencji struktura wirtualna dla takiej gleby musi składać się z przynamniej z kilkudziesięciu tysięcy cząstek. Uwzględnienie iłu w identyczny sposób jak piasku i pyłu wiązałoby się z koniecznością rozpatrywania zbiorów około 1000 razy większych, co jest tylko teoretycznie możliwe do zrobienia. Istnieje jeszcze przynajmniej jedna przyczyna, dla której uwzględnienie iłu w taki sam sposób jak piasku jest nieracjonalne: kształt cząstek iłu jest zbliżony bardziej do kartki papieru niż do kuli. Z tego względu (mała masa i duża powierzchnia właściwa) zasady upakowania cząstek iłu muszą być inne. Wydaje się więc uzasadnione traktowanie iłu na zupełnie innych zasadach, jak odrębną fazę gleby. Jednym ze sposobów umożliwiających

uwzględnienie frakcji iłu może być model, w którym przyjmuje się, że cząstki piasku i pyłu otoczone są warstwą iłu o grubości wynikającej z jego udziału masowego. Należałoby wówczas przypisać tej warstwie określoną porowatość i właściwe dla iłu charakterystyki mechaniczne, po czym dla takich cząstek stosować algorytmy upakowania cząstek kulistych.

PODSUMOWANIE

Przedstawiono nowy sposób badania granularnych ośrodków glebowych polegający na komputerowej rekonstrukcji ich struktury za pomocą upakowania zbioru polidyspersyjnych cząstek kulistych i tworzeniu tzw. wirtualnego ośrodka. W przyjętym modelu zakłada się, że identyczność składów granulometrycznych ośrodka rzeczywistego i wirtualnego oraz równość ich porowatości dowodzi ich podobieństwa, co pozwala wnioskować o właściwościach ośrodka rzeczywistego na podstawie wyników uzyskanych z analizy ośrodka wirtualnego.

Przedstawiono opis algorytmu tworzenia ośrodka wirtualnego, określono warunki jakie musi on spełniać, aby mógł być reprezentatywny dla ośrodka rzeczywistego (ang. Representative Element Volume REV) [4].

Celem stworzonego numerycznego modelu struktury gleby jest umożliwienie dokonywania wszechstronnej analizy badanej struktury i przewidywanie jej charakterystyk fizycznych, jak krzywa pF, współczynnik przewodnictwa wody itp., bez konieczności wykonywania długotrwałych i kosztownych pomiarów.

Przedstawiona metoda może służyć do badań gleby, jak i innych ośrodków granularnych: proszki, granulaty, materiały budowlane, ziarno w silosach.

LITERATURA

1. **Bodziony J.:** On the relationship between basic stereological characteristics. Stereol. Jugosl., 3, 97-102, 1981.
2. **Czachor H.:** Geometria fazy stałej i przestrzeni porów w rolniczych ośrodkach granularnych na przykładzie gleby mineralnej. Acta Agrophysica 7, 1997.
3. **Latey J.:** The Study of Soil Structure. Science or Art. Australian J. Soil Res., 29, 1991.
4. **Ringrose-Voase A.J.:** Micromorphology of soil structure: description,quantification, application. Australian J. Soil Res., 19, 1991.
5. **Russ J.C.:** Practical Stereology. Plenum Press., N-Y, London, 1986.
6. **Walczak R.:** Nowe aspekty metrologii agrofizycznej. Nauka Polska, 4, 1993.

INVESTIGATION OF SOIL STRUCTURE VIA COMPUTER PACKING SIMULATION

Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences, Doświadczalna 4
P.O. Box 201, 20-90 Lublin 27, email: hczachor@demeter.ipan .lublin.pl

S u m m a r y. The granular medium structure is manly determnied by its grain size distribution and the porosity. or another words by space distribution of medium particels. The possibilities of computer packing simulation method for the reconstration of virtual granular medium structure has been examined. The idea of the algorithm for a tight particle packing in $3D$ is described. Five virtual polidyspersive aggregates of different

grain size distributions composed up to 30,000 particles have been craeted. It was proved that their sizes are representative for the appropriate soil - like materials (sand and loamy sand). For all examined cases the calculated volume porositic of virtual structure agree well with the experimental data (relative difference <5%). Such virtual structure can be utilize for the determination of physical properties of different granular materials (mineral soils, wheat and rape grains etc).

K y e w o r d s: soil structure, grain size distribution, packing simulation